

Posudek vedoucího práce

Diplomová práce **Bc. Zdeňky Janíkové** s názvem „**Studium přípravy a struktury koordinačních sloučenin p-prvků s biochemickými relevancemi**“ se zabývá studiem přípravy, struktury a reaktivity několika typů sloučenin - aduktů dusíkaté organické báze s chloridy pniktogenů v nejvyšším oxidačním stavu. Tento náročný cíl práce byl vybrán za účelem hodnocení typu a kalibrace síly nekovalentních interakcí mezi dvěma prvky 15. respektive 15. a 17. skupiny periodického systému, které hrají jednu z dominantních rolí v biochemii, zejména při vzájemných interakcích nukleotidů (báze-fosfát/chlorid). Takováto evaluace byla uskutečněna na několika řadách modelových sloučenin, které byly připraveny v aprotických rozpouštědlech s vyloučením vlhkosti. V rámci této diplomové práce bylo připraveno několik těchto sloučenin obsahujících jako akceptorní složku komplexu atomy fosforu a antimonu. Jako báze byly použity deriváty pyridinu, diaziny a triaziny, v případě pokusů o syntézu aduktů purinových a pyrimidinovýchází vyskytujících se v organizmech nebylo tyto možné připravit z důvodu jejich nerozpustnosti v nepolárních aprotických rozpouštědlech. V případě nově připravených aduktů a komplexů byla studována jejich struktura v roztocích a v tuhé fázi.

Během této práce si kandidátka osvojila techniku práce ve striktně inertním prostředí, přípravu vzorků pro NMR spektroskopická měření ve vakuu, asistovala při samotném měření a umí NMR spektra vyhodnotit. Dále připravila několik desítek monokrystalických vzorků vhodných pro měření pomocí rentgenostrukturních technik, výsledky pomocí nich zjištěné interpretovala do grafické podoby, a podílela se i na interpretaci struktur včetně jejich srovnání s literaturou.

Samotná diplomová práce je členěna klasickým způsobem, kdy v poměrně obsáhlé teoretické části jsou shrnuty dosavadní poznatky o studovaných třídách sloučenin a jejich biologických vlastností. Dále jsou v práci nastíněny doposud známé skutečnosti týkající se vzájemných interakcí těchto tříd pomocí nekovalentních interakcí. Experimentální část popisuje syntézu sloučenin a jejich reaktivitu. Syntézní část této práce vykazuje vysokou míru důvtipu a zkušeností diplomantky zejména v oblasti přípravy sloučenin, a jejich reaktivity ve striktně inertní atmosféře i ve vakuu. Struktura a reaktivita sloučenin byla studována pomocí multinukleární NMR spektroskopie a RTG technik na monokrystalickém materiálu. Výsledky

syntéz a analýzy všech materiálů této bezesporu mezioborově pojaté DP jsou správně interpretovány, jejich diskuze stručná a výstižná, a závěry korektní.

Diplomantka bravurně zvládla preparativní část práce a velmi významně se podílela na interpretaci získaných výsledků. Diplomová práce je velice zdařilá jak po grafické, tak i jazykové stránce.

Výsledky prezentované v této diplomové práci bezesporu přispějí k dalšímu objasnění povahy a síly interakcí v biologických systémech, a jsou již nyní připraveny k publikování ve formě článku v prestižním zahraničním časopise (rukopis bude odeslán do redakce po dokončení teoretických kalkulací prováděných týmem prof. Hobzy).

Tuto práci hodnotím známkou

výborně

V Pardubicích 25. května 2017



prof. Ing. Aleš Růžička, Ph.D.

KOAnCh